Metody Inteligencji Obliczeniowej

Metoda K Najbliższych Sąsiadów (KNN)

Adrian Horzyk

horzyk@agh.edu.pl

AGH Akademia Górniczo-Hutnicza

Wydział Elektrotechniki, Automatyki, Informatyki i Inżynierii Biomedycznej

Katedra Automatyki i Inżynierii Biomedycznej

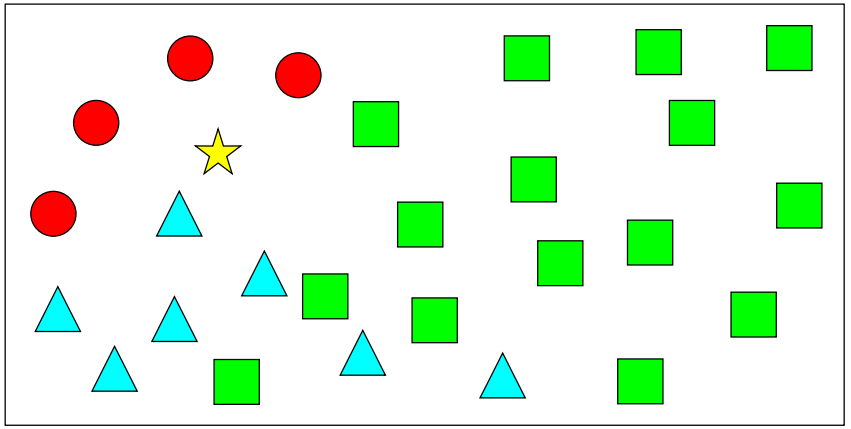
Laboratorium Biocybernetyki

30-059 Kraków, al. Mickiewicza 30, paw. C3/205

WSTĘP

- ✓ **Metoda K Najbliższych Sąsiadów (k-Nearest Neighbors) należy do grupy algorytmów leniwych (*lazy algorithms*), czyli takich, które nie tworzą wewnętrznej reprezentacji danych uczących, lecz szukają rozwiązania dopiero w momencie pojawienia się wzorca testującego, np. do klasyfikacji. Przechowuje wszystkie wzorce uczące, względem których wyznacza odległość wzorca testowego.**

- ✓ **Do którego zbioru należy gwiazdka?**

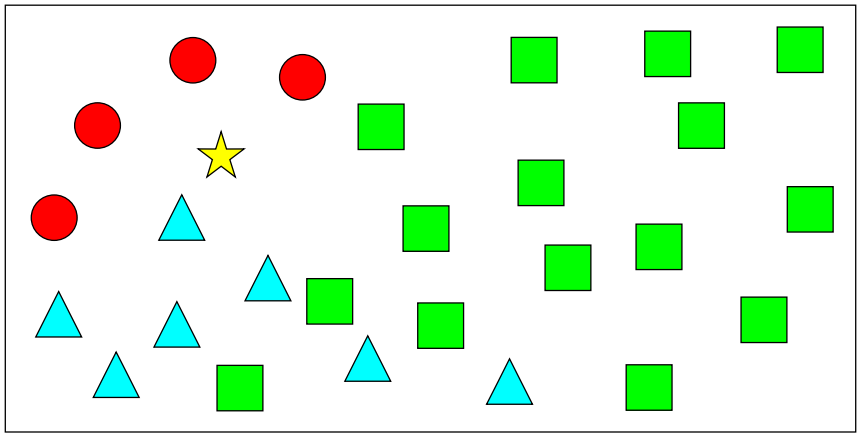


- ✓ **Do grupy metod gorliwych (*eager learning algorithms*) należą zaś takie algorytmy uczące, które na podstawie danych uczących tworzą wewnętrzną ich reprezentację (swoisty rodzaj wiedzy o problemie). W momencie pojawienia się wzorca testującego korzystając z tej wewnętrznej reprezentacji dokonują jego np. klasyfikacji.**
  Do tej grupy metod należą wszystkie rodzaje sieci neuronowych oraz rozwiązania oparte na logice rozmytej, drzewach decyzyjnych i wiele innych. Po zakończonej nauce (adaptacji modelu), dane uczące mogą być usunięte.

ZBIÓR WZORCÓW UCZĄCYCH

- ✓ **Zbiór wzorców uczących (*learning patterns, training examples*)** składa się ze zbioru par $<\mathbf{x}^i, y^i>$, gdzie $\mathbf{x}^i$ jest zbiorem parametrów $\mathbf{x}^i = \{x^i_1, \ldots, x^i_n\}$ definiujących obiekty (zwykle w postaci wektora lub macierzy danych), zaś y^i jest wartością przewidywaną/powiązaną/skojarzoną, np. indeksem lub nazwą klasy, do której obiekt $\mathbf{x}^i$ należy i którą razem z innymi obiektami tej klasy definiuje.

- ✓ Na rysunku mamy obiekty należące do 3 klas: kółeczka, trójkąciki i kwadraciki.



- ✓ Gwiazdka jest nowym obiektem, który chcemy sklasyfikować, czyli przyporządkować do jednej z istniejących klas obiektów.

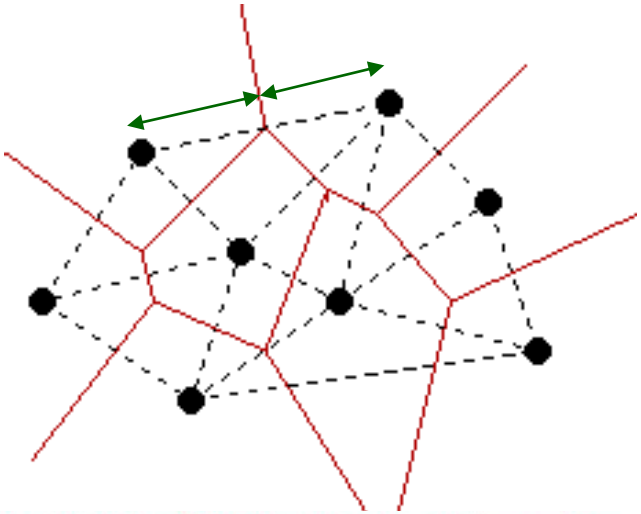
- ✓ Do którego zbioru należy gwiazdka? Co nam podpowiada intuicja?

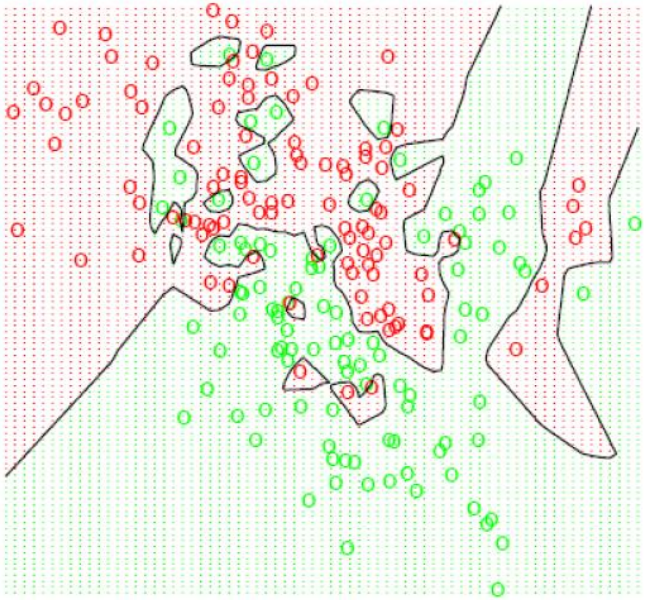
- ✓ Można np. badać odległość gwiazdki od pozostałych obiektów, dla których klasa jest znana, korzystając z jednej ze znanych metryk, np. odległości Euklidesa:

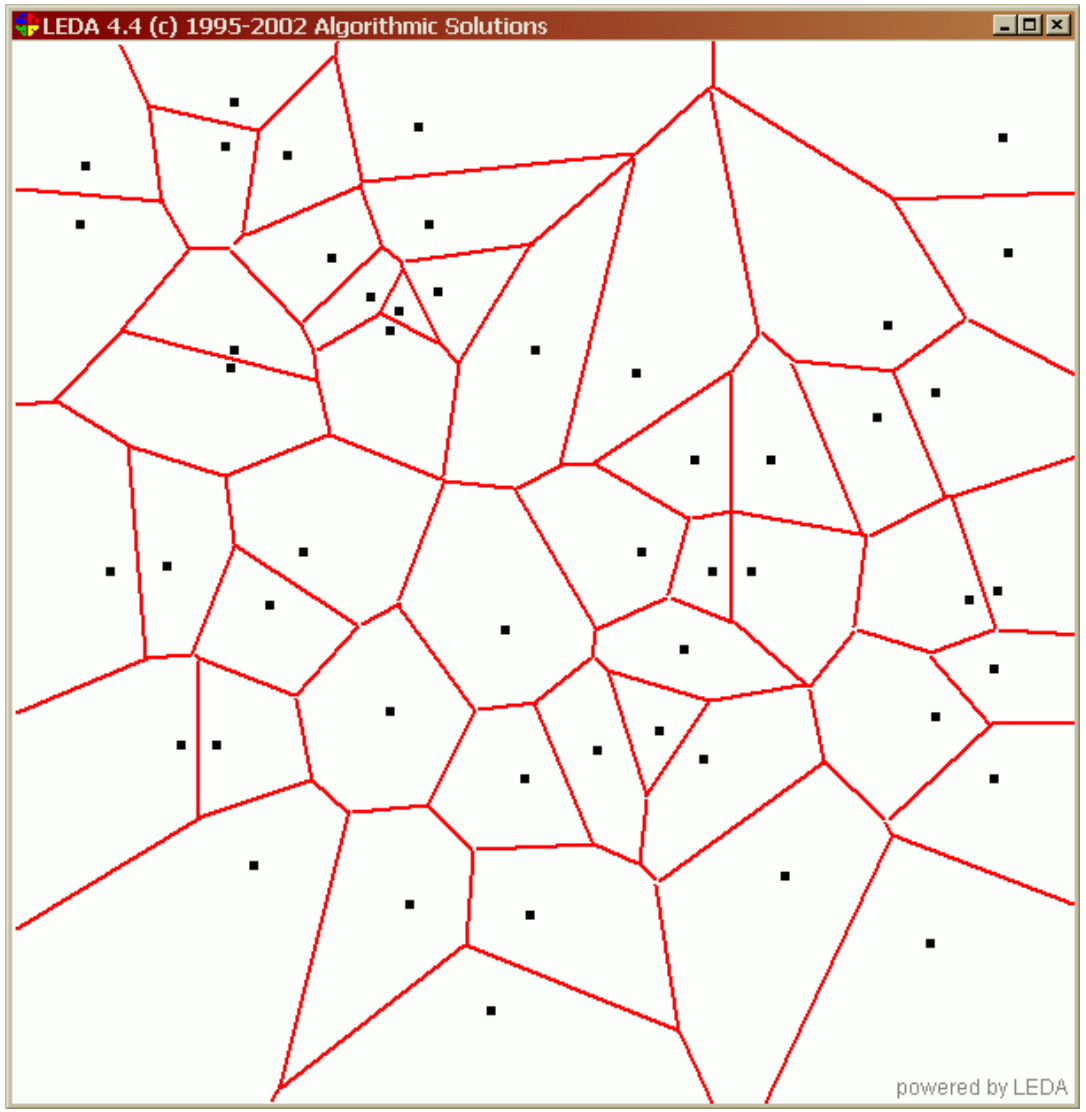
$$\left\| \mathbf{x} - \mathbf{x}^i \right\|^2 = \sum_j (x_j - x^i_j)^2$$

DIAGRAMY VORONOI

- ✓ **Diagramy Voronoi (*Voronoi diagrams*) ilustrują obszary przyciągania (*attraction areas*) do najbliższych pojedynczych elementów w przestrzeni:**

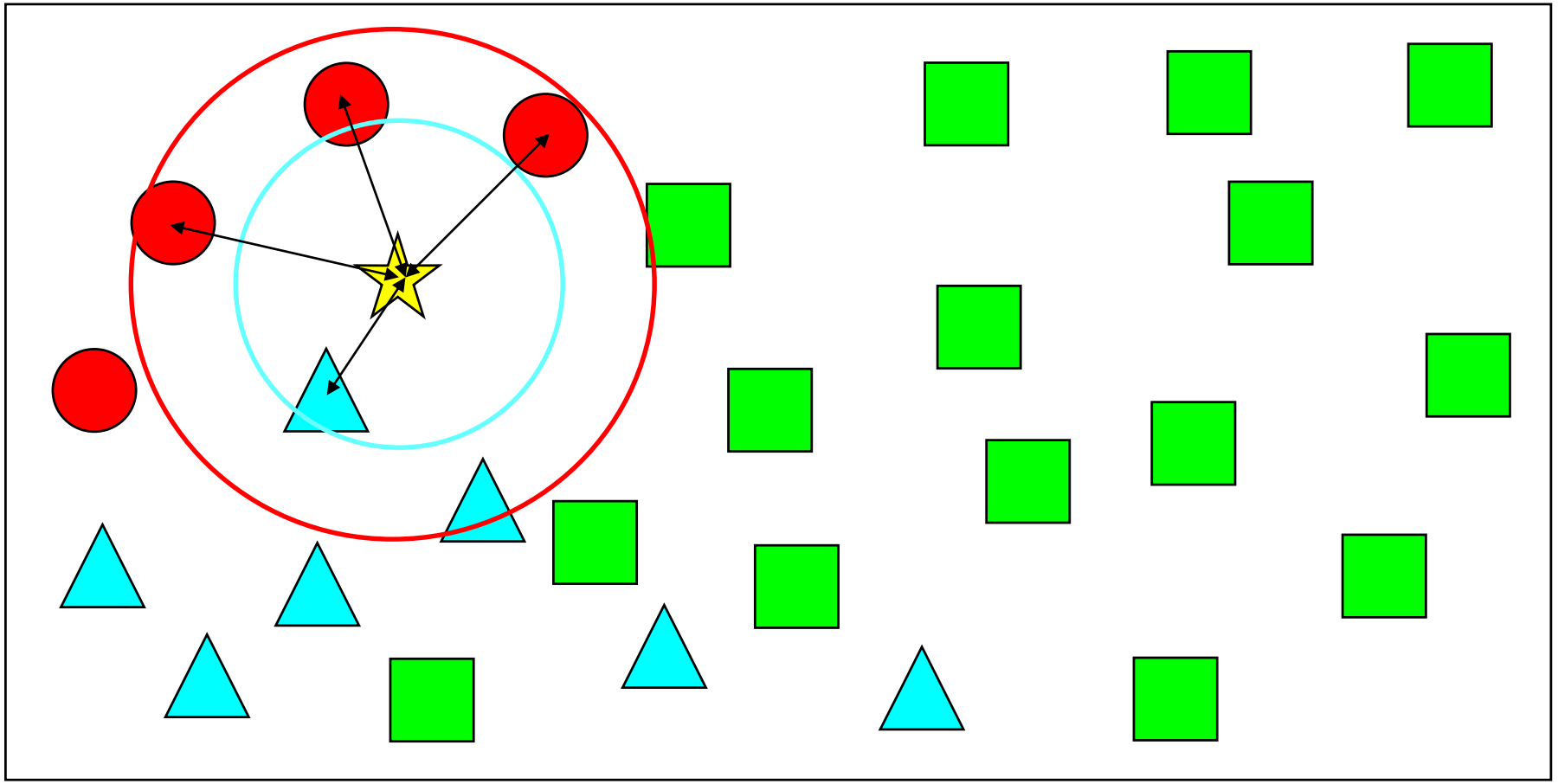






METODA K NAJBLIŻSZYCH SĄSIADÓW

- ✓ **Metoda k Najbliższych Sąsiadów (k-Nearest Neighbors) wyznacza k sąsiadów, do których badany element (gwiazdka) ma najbliżej dla wybranej metryki (np. Euklidesowej), a następnie wyznacza wynik w oparciu o głos większości:**



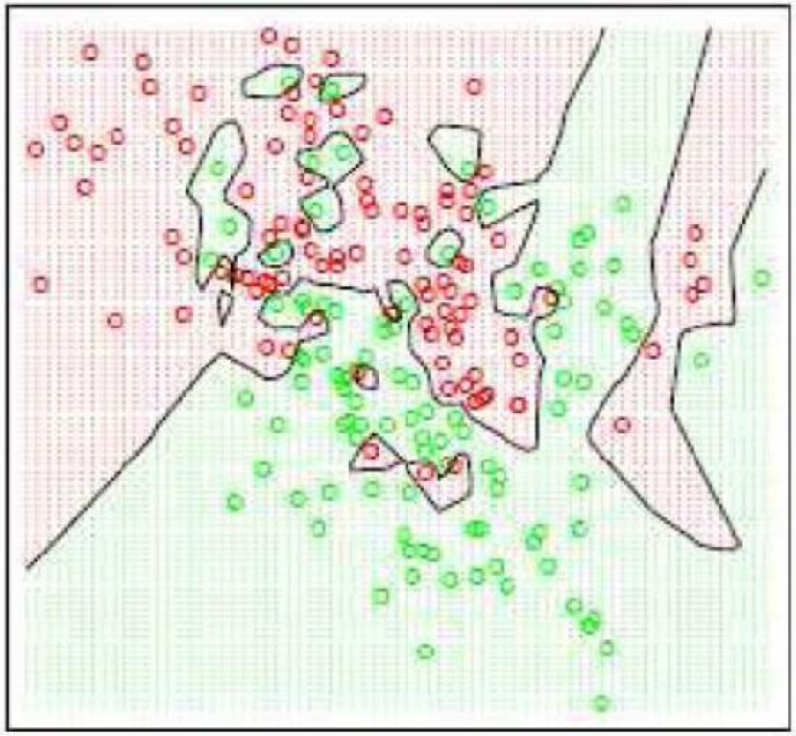
Do którego zbioru należy gwiazdka?

Zależy to od tego ilu najbliższych sąsiadów weźmiemy pod uwagę.

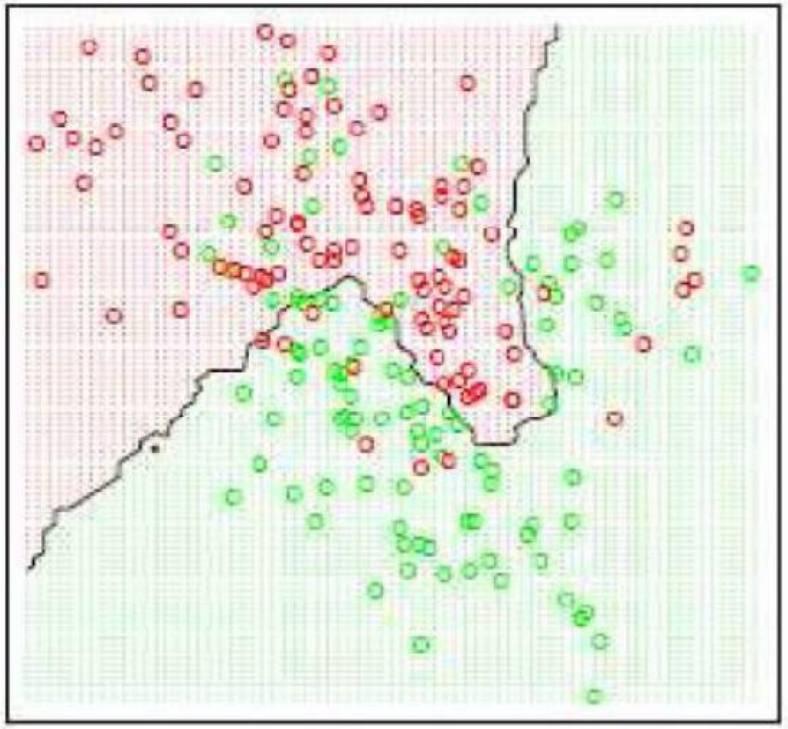
METODA K NAJBLIŻSZYCH SĄSIADÓW

- ✓ **Metoda k Najbliższych Sąsiadów (k-Nearest Neighbors)** daje różne wyniki w postaci obszarów przyciągania, co determinuje wynik klasyfikacji:

K=1



K=15



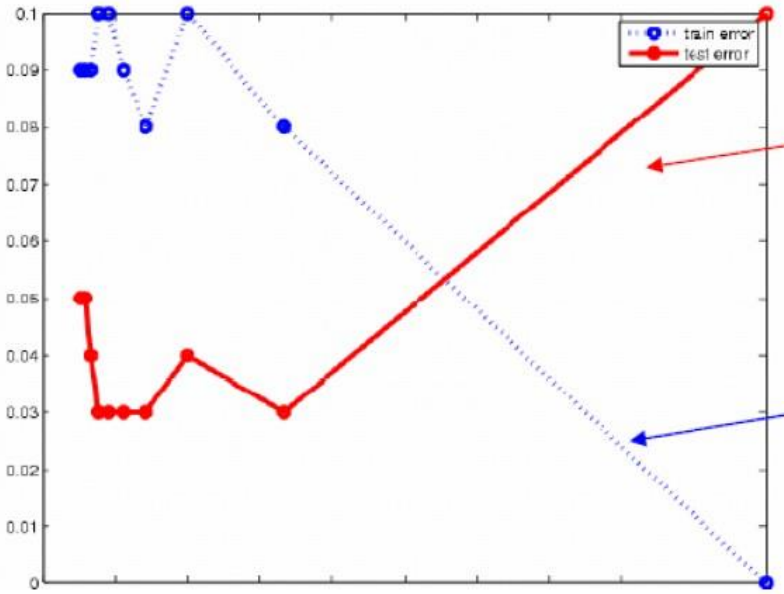
Figures from Hastie, Tibshirani and Friedman (Elements of Statistical Learning)

- ✓ Większe wartości k umożliwiają wygładzenie obszarów podziału, usunięcie szumu i artefaktów, lecz również prowadzą do błędów w klasyfikacji rzadszych wzorców. Pojawia się problem ich poprawnej dyskryminacji i uogólniania.

Dobieranie wartości k

- ✓ Jeślibyśmy wzięli pod uwagę k=N, gdzie N to ilość wszystkich elementów zbioru wzorców uczących, wtedy zawsze wynik klasyfikacji będzie określony przez najliczniej reprezentowaną klasę w tym zbiorze uczących, a więc w tym przykładzie: kwadraciki.

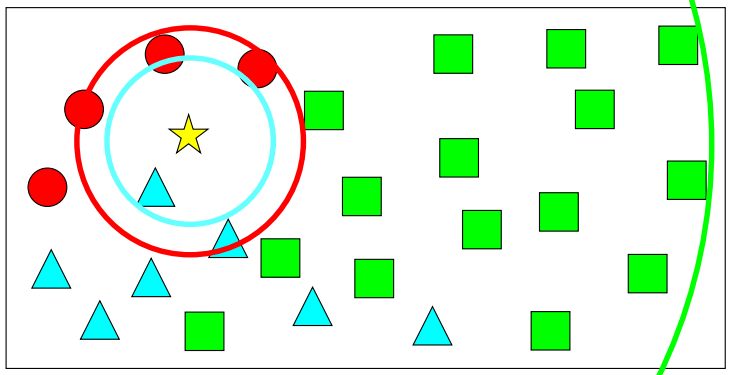
Przykładowy wykres zależności wyników adaptacji od wartości k:



K=20 K=1

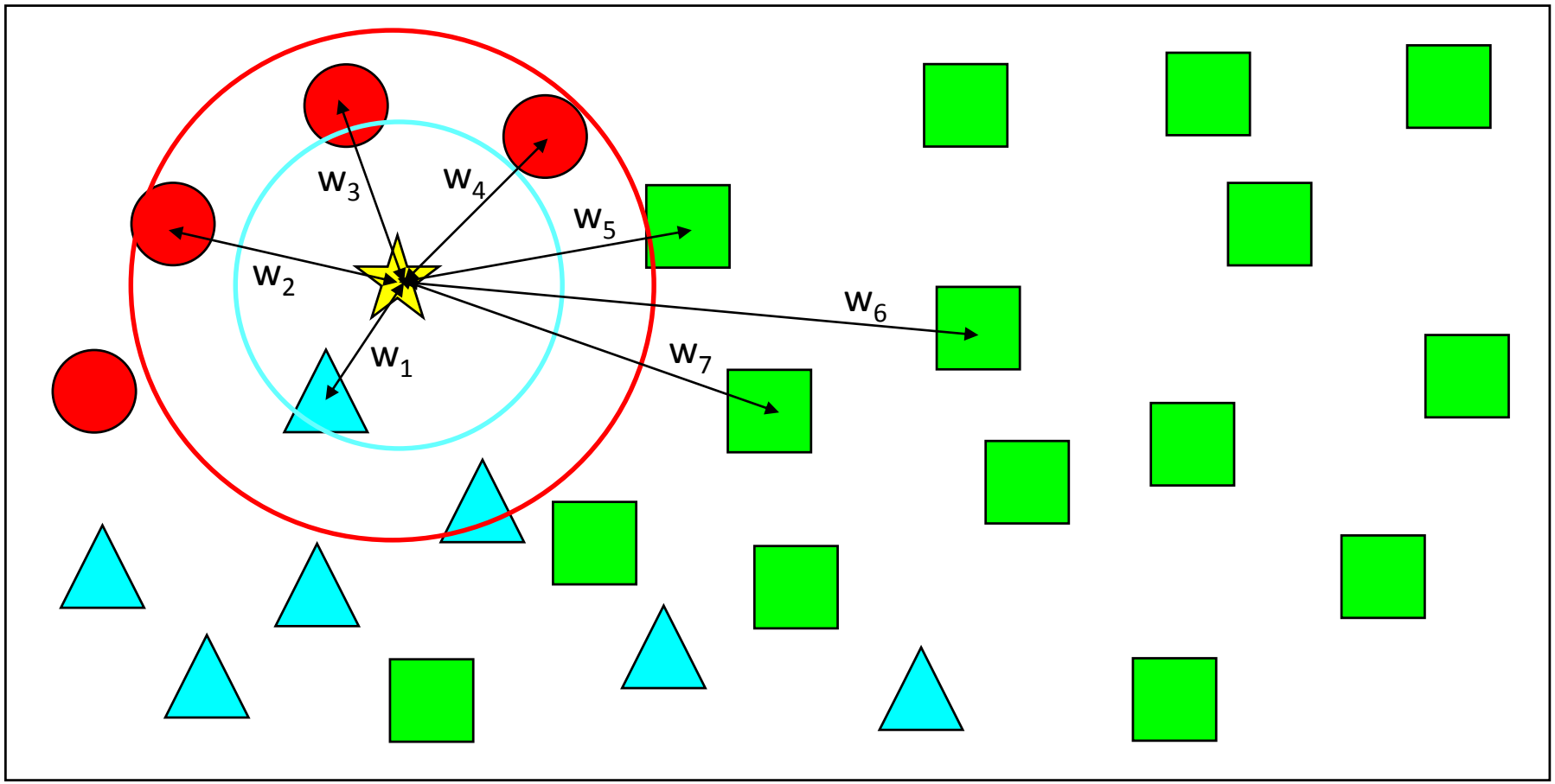
BŁĄD TESTU

BŁĄD UCZENIA



MODYFIKACJE METODY K NAJBLIŻSZYCH SĄSIADÓW

- ✓ **Metoda Ważonych Odległości Najbliższych Sąsiadów (Distance Weighted Nearest Neighbors) prowadzi do głosowania na temat klasyfikacji gwiazdki biorąc pod uwagę k najbliższych sąsiadów lub nawet wszystkie wzorce, lecz ich głosy są ważone w zależności od ich odległości (dla wybranej metryki) do gwiazdki: im dalej jest głosujący wzorzec tym ma mniejszą wagę. A więc wzorce położone najbliżej będą miały największy wpływ na wynik klasyfikacji:**



TRUDNOŚCI METOD K NAJBLIŻSZYCH SĄSIADÓW

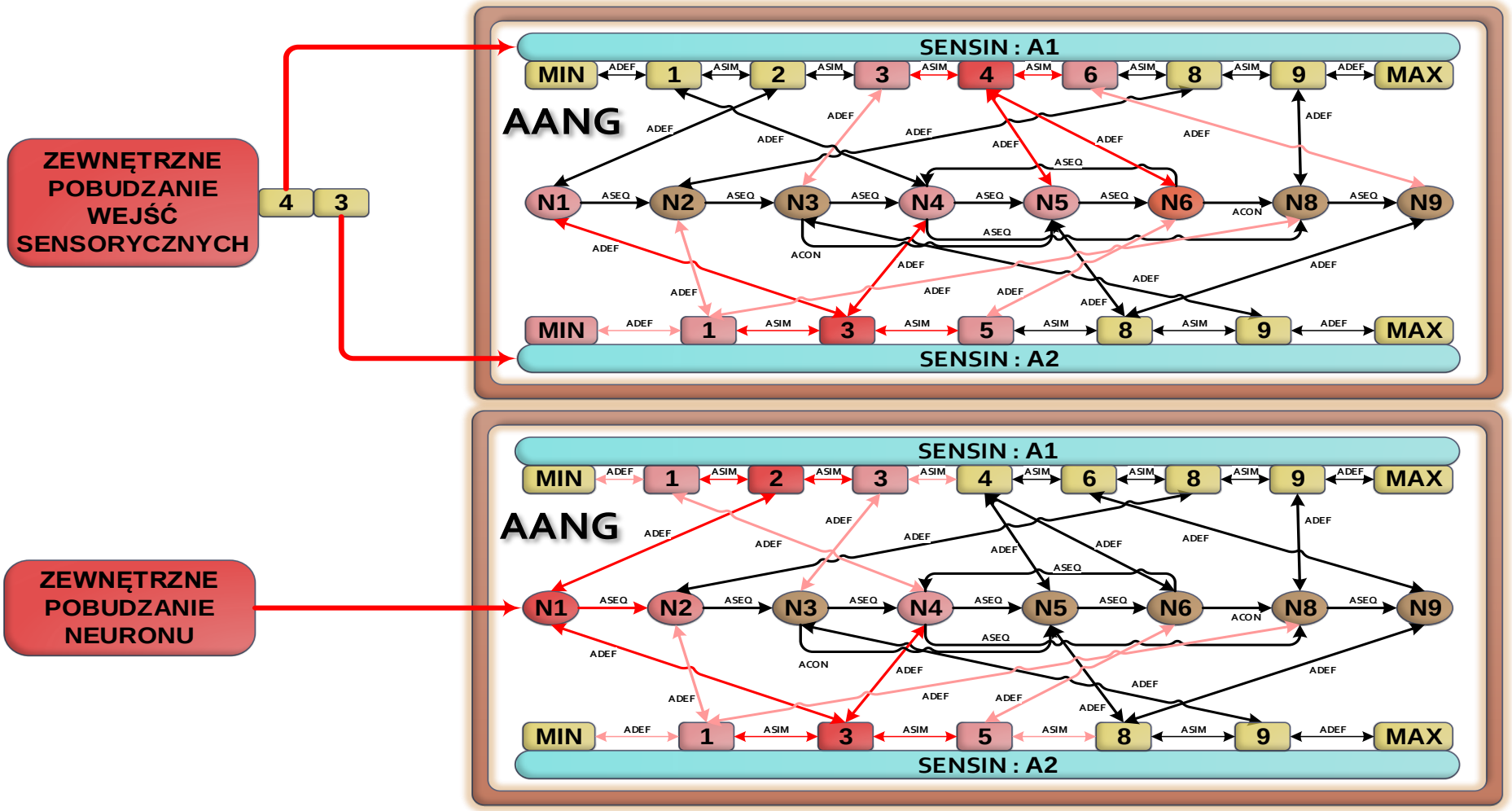
- ✓ **Metody Najbliższych Sąsiadów ponoszą karę za swoje „lenistwo”, związane z brakiem budowy modelu generalizującego wzorce uczące. Wymagają przeglądania w pętlach wszystkich wzorców uczących po wszystkich wymiarach.**
- ✓ **W przypadku dużej ilości wzorców lub dużego wymiaru danych klasyfikacja wymaga zwykle porównania z każdym wzorcem, co wiąże się z ogromnym narzutem czasowym w trakcie klasyfikacji. Od tego wolne są inne modele, które dla wzorców uczących raz budują model (pewnym nakładem czasowym), lecz potem klasyfikacja przebiega już bardzo szybko!**
- ✓ **Nawet w przypadku poindeksowania wzorców względem każdego wymiaru/parametru w bazie danych, trzeba przejść po każdym z wymiarów, w celu określenia najbliższych sąsiadów, co też jest czasochłonne w zależności od wyboru k. W metodach sprawdzających ważone odległości do wszystkich wzorców i tak trzeba przejść po nich wszystkich każdorazowo.**
- ✓ **Metoda jest wrażliwa na dane zaszumione lub błędne, np. w odniesieniu do niektórych cech wzorców (*noisy features*). Mogą one zmienić wynik klasyfikacji.**
- ✓ **Metoda k-NN natomiast dosyć dobrze działa dla dużej ilości klas.**

PRÓBY ROZWIĄZANIA:

- ✓ **Adaptacja sposobu określania odległości poprzez adaptacyjne ważenie cech, odległości, wartości k.**

MODYFIKACJE METODY K NAJBLIŻSZYCH SĄSIADÓW

- ✓ **Korzystając z asocjacyjnego sortowania oraz neuronowych struktur AANG można by było bardzo szybko wyznaczyć najbliższych sąsiadów na podstawie podobieństwa do prezentowanego wzorca na wejściu, lecz po co, skoro sama sieć AANG również umożliwia klasyfikację, zwykle nie gorszą niż k-NN, a w dodatku tworzy model na podstawie danych uczących, co znacznie przyspiesza końcowy proces klasyfikacji.**



PORÓWNANIE WYNIKÓW KLASYFIKACJI AANG i kNN

CONGRESS VOTING (435 wzorców, 16 parametrów	UCZEN	WALID	IONOSPHERE (29289 wzorców, 34 parametrów)	UCZEN	WALID
Algorytm i parametry	Q_COR (avg)	Q_COR (avg)	**Algorytm (parametry)**	Q_COR (avg)	Q_COR (avg)
NAJLEPSZY WYNIK:	**100,00**	**96,55**	**NAJLEPSZY WYNIK:**	**100,00**	**94,30**
SVM Multiclass Linear (cost=50;eps=0,1)	96,78	96,55	SVM Multiclass RBF (cost=10;sigma=1;eps=0,1)	100,00	94,30
SVM Multiclass RBF (cost=10;sigma=5;eps=0,1)	98,60	96,08	SVM Multiclass RBF (cost=10;sigma=5;eps=0,1)	97,06	94,30
SVM Multiclass Linear (cost=1;eps=0,1)	97,16	96,08	**ASONN (stopień dyskryminacji=2;rozmycie brzegów=2)**	99,27	91,75
SVM Multiclass Linear (cost=20;eps=0,001)	97,47	96,08	**AANG ()**	100,00	91,46
SVM Multiclass Linear (cost=100;eps=0,1)	96,65	96,07	**ASONN (stopień dyskryminacji=3;rozmycie brzegów=1)**	99,21	90,87
RBFN (k=15;funk-radial=1;met.wybor.centr=2)	95,96	96,07	**ASONN (stopień dyskryminacji=2;rozmycie brzegów=1)**	99,11	90,87
SVM Multiclass Linear (cost=20;eps=0,1)	97,16	95,86	RBFN (k=15;funk-radial=1;met.wybor.centr=2)	90,88	90,32
SVM Multiclass Linear (cost=10;eps=0,1)	97,04	95,85	RBFN(k=15;funk-radial=2;met.wybor.centr=2)	91,04	90,31
RBFN (k=20;funk-radial=1;met.wybor.centr=2)	96,53	95,85	SVM Multiclass RBF (cost=10;sigma=10;eps=0,1)	94,08	90,30
SVM Multiclass Linear (cost=20;eps=0,01)	97,47	95,85	SVM MulticlassP (cost=10;d=4;eps=0,01)	96,96	90,06
SVM Multiclass RBF (cost=10;sigma=10;eps=0,1)	96,73	95,39	SVM Multiclass Linear (cost=10;eps=0,1)	93,95	90,02
ASONN (stopień dyskryminacji=1;rozmycie brzegów=2)	100,00	95,18	**ASONN (stopień dyskryminacji=1;rozmycie brzegów=1)**	98,54	89,75
RBFN(k=15;funk-radial=2;met.wybor.centr=2)	95,94	95,17	RBFN (k=20;funk-radial=2;met.wybor.centr=1)	91,52	89,74
RBFN (k=10;funk-radial=1;met.wybor.centr=2)	95,12	94,92	RBFN (k=15;funk-radial=2;met.wybor.centr=1)	91,04	89,73
ASONN (stopień dyskryminacji=2;rozmycie brzegów=1)	100,00	94,72	SVM Multiclass Linear (cost=50;eps=0,1)	92,72	89,73
ASONN (stopień dyskryminacji=2;rozmycie brzegów=2)	100,00	94,72	**ASONN (stopień dyskryminacji=3;rozmycie brzegów=3)**	99,15	89,17
SONN-3 (Adrian Horzyk)()	100,00	94,71	RBFN(k=20;funk-radial=2;met.wybor.centr=2)	91,83	89,17
ASONN (stopień dyskryminacji=1;rozmycie brzegów=1)	100,00	94,49	**ASONN (stopień dyskryminacji=3;rozmycie brzegów=2)**	99,21	89,17
ASONN (stopień dyskryminacji=3;rozmycie brzegów=3)	100,00	94,48	SVM Multiclass Linear (cost=20;eps=0,1)	93,80	88,88
ASONN (stopień dyskryminacji=Auto;rozmycie brzegów=1)	100,00	94,48	SVM Multiclass Linear (cost=20;eps=0,001)	94,87	88,88
ASONN (stopień dyskryminacji=3;rozmycie brzegów=2)	100,00	94,48	**ASONN (stopień dyskryminacji=1;rozmycie brzegów=2)**	98,54	88,61
ASONN (stopień dyskryminacji=3;rozmycie brzegów=1)	100,00	94,48	RBFN (k=10;funk-radial=1;met.wybor.centr=2)	89,97	88,32
RBFN (k=10;funk-radial=2;met.wybor.centr=2)	94,23	94,01	SVM Multiclass RBF (cost=10;sigma=0,5;eps=0,1)	100,00	88,31
RBFN (k=5;funk-radial=1;met.wybor.centr=2)	94,05	93,32	SVM Multiclass Linear (cost=20;eps=0,01)	94,75	88,02
PNN Simple (sigma=0,1)	100,00	93,10	RBFN (k=20;funk-radial=1;met.wybor.centr=2)	92,15	87,75
K nn (k=1)	100,00	92,88	SVM Multiclass Linear (cost=1;eps=0,1)	93,16	87,74
RBFN (k=10;funk-radial=2;met.wybor.centr=1)	92,95	92,86	SVM Multiclass Linear (cost=100;eps=0,1)	92,09	87,18
AANG ()	100,00	92,63	K nn (k=1)	100,00	86,90
K nn (k=3)	92,49	92,39	RBFN (k=10;funk-radial=2;met.wybor.centr=1)	88,54	86,89
PNN Simple (sigma=1)	98,75	92,18	**SONN-3 (Adrian Horzyk)()**	97,28	86,62
K nn (k=5)	91,16	91,93	**ASONN (stopień dyskryminacji=Auto;rozmycie brzegów=1)**	98,96	86,59
K nn (k=10)	91,24	90,32	PNN Simple (sigma=1)	94,30	86,33
RBFN (k=5;funk-radial=2;met.wybor.centr=2)	90,96	89,87	SVM MulticlassP (cost=10;d=3;eps=0,01)	97,88	86,02
K nn (k=15)	89,22	89,20	K nn (k=3)	85,82	83,48
PNN Simple (sigma=100)	89,35	88,95	RBFN (k=5;funk-radial=1;met.wybor.centr=2)	84,33	83,25
PNN Simple (sigma=10)	89,40	88,95	RBFN (k=10;funk-radial=2;met.wybor.centr=2)	86,99	82,90
K nn (k=30)	88,48	88,94	K nn (k=5)	82,40	80,35
SVM Multiclass RBF (cost=10;sigma=1;eps=0,1)	100,00	85,98	SVM MulticlassP (cost=10;d=6;eps=0,01)	81,16	80,35
SVM Multiclass RBF (cost=10;sigma=0,5;eps=0,1)	100,00	78,39	RBFN (k=5;funk-radial=2;met.wybor.centr=1)	80,41	80,33

PORÓWNANIE WYNIKÓW KLASYFIKACJI AANG i kNN

WINE (178 wzorców, 13 parametrów)	UCZEN	WALID	IRIS (150 wzorców, 4 parametry)	UCZEN	WALID
Algorytm i parametry	Q_COR (avg)	Q_COR (avg)	**Algorytm i parametry**	Q_COR (avg)	Q_COR (avg)
NAJLEPSZY WYNIK:	100,00	99,44	**NAJLEPSZY WYNIK:**	100,00	98,00
ASONN (stopień dyskryminacji=2; rozmycie brzegów=2)	100,00	99,44	RBFN(k=15;funkcja radialna=1;metoda wyboru centrów=2)	98,89	98,00
RBFN(k=15; funkcja radialna=1; metoda wyboru centrów=2)	99,69	99,41	RBFN(k=20;funkcja radialna=1;metoda wyboru centrów=2)	98,44	97,33
ASONN (stopień dyskryminacji=2; rozmycie brzegów=1)	100,00	98,89	SVM Multiclass RBF(cost=10;sigma=5;eps=0,1)	97,41	96,67
ASONN (stopień dyskryminacji=3; rozmycie brzegów=1)	100,00	98,89	K nn(k=1)	100,00	96,00
ASONN (stopień dyskryminacji=3; rozmycie brzegów=2)	100,00	98,89	K nn(k=10)	93,93	96,00
ASONN (stopień dyskryminacji=3; rozmycie brzegów=3)	100,00	98,89	K nn(k=15)	92,07	96,00
RBFN(k=20; funkcja radialna=1; metoda wyboru centrów=2)	99,94	98,30	RBFN(k=10;funkcja radialna=2;metoda wyboru centrów=2)	97,04	96,00
ASONN (stopień dyskryminacji=0; rozmycie brzegów=1)	100,00	97,78	PNN Simple(sigma=0,1)	100,00	96,00
AANG ()	100,00	97,19	**ASONN (stopień dyskryminacji=1;rozmycie brzegów=1**	100,00	95,33
ASONN (stopień dyskryminacji=1; rozmycie brzegów=1)	100,00	96,67	**ASONN (stopień dyskryminacji=1;rozmycie brzegów=2)**	100,00	95,33
RBFN(k=10; funkcja radialna=1; metoda wyboru centrów=2)	98,50	96,63	SVM Multiclass RBF(cost=10;sigma=0,5;eps=0,1)	99,26	95,33
ASONN (stopień dyskryminacji=1; rozmycie brzegów=2)	100,00	96,11	SVM Multiclass RBF(cost=10;sigma=1;eps=0,1)	98,44	95,33
SVM Multiclass Linear(cost=20; eps=0,001)	97,63	95,56	SVM Multiclass RBF(cost=10;sigma=10;eps=0,1)	95,63	95,33
SONN-3 ()	100,00	91,08	RBFN(k=5;funkcja radialna=2;metoda wyboru centrów=2)	96,07	95,33
SVM Multiclass Linear(cost=20; eps=0,01)	93,95	90,49	K nn(k=5)	95,63	94,67
RBFN(k=5; funkcja radialna=1; metoda wyboru centrów=2)	82,52	84,38	SVM Multiclass Linear(cost=10;eps=0,1)	94,81	94,67
SVM Multiclass RBF(cost=10; sigma=10; eps=0,1)	100,00	78,04	SVM Multiclass Linear(cost=20;eps=0,1)	95,56	94,67
K nn(k=1)	100,00	77,52	SVM Multiclass Linear(cost=20;eps=0,001)	95,85	94,67
PNN Simple(sigma=1)	100,00	75,82	RBFN(k=5;funkcja radialna=2;metoda wyboru centrów=1)	95,63	94,67
PNN Simple(sigma=10)	90,82	75,78	RBFN(k=10;funkcja radialna=1;metoda wyboru centrów=2)	97,78	94,67
PNN Simple(sigma=100)	73,91	72,97	**AANG ()**	100,00	94,00
RBFN(k=10; funkcja radialna=2; metoda wyboru centrów=2)	69,66	69,61	**ASONN (stopień dyskryminacji=0;rozmycie brzegów=1)**	100,00	94,00
RBFN(k=5; funkcja radialna=2; metoda wyboru centrów=2)	69,85	68,46	**ASONN (stopień dyskryminacji=2;rozmycie brzegów=1)**	100,00	94,00
RBFN(k=15; funkcja radialna=2; metoda wyboru centrów=2)	67,80	67,35	**ASONN (stopień dyskryminacji=2;rozmycie brzegów=2)**	100,00	94,00
RBFN(k=15; funkcja radialna=2; metoda wyboru centrów=1)	67,79	66,83	**ASONN (stopień dyskryminacji=3;rozmycie brzegów=1)**	100,00	94,00
K nn(k=3)	67,48	66,27	**ASONN (stopień dyskryminacji=3;rozmycie brzegów=2)**	100,00	94,00
K nn(k=5)	66,29	66,24	**ASONN (stopień dyskryminacji=3;rozmycie brzegów=3)**	100,00	94,00
K nn(k=30)	62,66	66,18	K nn(k=3)	94,52	94,00
SVM Multiclass RBF(cost=10; sigma=5; eps=0,1)	100,00	65,75	SVM Multiclass Linear(cost=100;eps=0,1)	94,37	94,00
RBFN(k=5; funkcja radialna=2; metoda wyboru centrów=1)	69,66	65,69	PNN Simple(sigma=1)	94,59	94,00
K nn(k=15)	64,80	65,13	SVM Multiclass Linear(cost=1;eps=0,1)	93,85	93,33
RBFN(k=20; funkcja radialna=2; metoda wyboru centrów=1)	69,29	65,10	SVM Multiclass Linear(cost=20;eps=0,01)	95,41	93,33
K nn(k=10)	68,85	64,09	RBFN(k=5;funkcja radialna=1;metoda wyboru centrów=2)	95,33	93,33
SVM Multiclass RBF(cost=10; sigma=0,5; eps=0,1)	100,00	39,93	RBFN(k=15;funkcja radialna=2;metoda wyboru centrów=2)	96,37	92,67
SVM Multiclass RBF(cost=10; sigma=1; eps=0,1)	100,00	39,93	SVM Multiclass Linear(cost=50;eps=0,1)	94,59	92,00
SVM Multiclass Linear(cost=1; eps=0,1)	33,15	33,14	**SONN-3 ()**	99,85	91,33
SVM Multiclass Linear(cost=10; eps=0,1)	33,15	33,14	PNN Simple(sigma=10)	91,48	90,67
SVM Multiclass Linear(cost=100; eps=0,1)	33,15	33,14	PNN Simple(sigma=100)	91,48	90,67